

Школа Инженерная школа ядерных технологий
 Направление подготовки 03.03.02 «Физика»
 Отделение школы (НОЦ) Экспериментальной физики
БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Моделирование изменения структуры пучка углеродных нанотрубок при воздействии механического давления и газов

УДК 620.18:531.7.001.5

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б51	Николаева Александра Владимировна		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОЭФ ИЯТШ	Лидер Андрей Маркович	д.т.н., доцент		

Консультант

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель ОЭФ ИЯТШ	Чистякова Надежда Владимировна	к.ф-м.н		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Конотопский Владимир Юрьевич	к.э.н., доцент		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель ООД ШБИП	Скачкова Лариса лександровна			

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель отделения ЭФ ИЯТШ	Лидер Андрей Маркович	д.т.н., доцент		

Запланированные результаты обучения по программе

Код результата	Результат обучения (выпускник способен)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Общекультурные компетенции</i>		
P1	Использовать основные этапы и закономерности исторического развития общества, основы философских, экономических, правовых знаний для формирования мировоззренческой, гражданской позиций и использования в различных сферах жизнедеятельности	Требования ФГОС3+ (ОК-1, ОК-2, ОК-3, ОК-4)
P2	К самоорганизации и самообразованию, работать в коллективе, к коммуникации в устной и письменной формах, в том числе на иностранном языке, толерантно воспринимать социальные, этические и культурные различия, использовать методы и средства физической культуры, приёмы первой помощи и методы защиты в условиях ЧС.	Требования ФГОС3+ (ОК-5,ОК-6,ОК-7, ОК-8, ОК-9)
<i>Общепрофессиональные компетенции</i>		
P3	Использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, современные концепции и ограничения естественных наук, использовать фундаментальные знания разделов общей и теоретической физики, математики для создания моделей и решения типовых профессиональных задач, в том числе с использованием знаний профессионального иностранного языка.	Требования ФГОС3+ (ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-7)
P4	Понимать сущность и значение информации, соблюдать основные требования информационной безопасности, использовать методы, способы, средства получения и хранения информации, решать стандартные задачи на основе информационной и библиографической культуры.	Требования ФГОС3+ (ОПК-4,ОПК-5, ОПК-6)
P5	Получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах, критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, нести ответственность за последствия своей инженерной деятельности.	Требования ФГОС3+ (ОПК-8, ОПК-9)
<i>Профессиональные компетенции</i>		
P6	<u>Научно-исследовательская деятельность</u> Проводить научные теоретические и экспериментальные исследования в областях: материаловедения, атомной и ядерной физики, водородной энергетики, физики плазмы с помощью современной приборной базы с использованием специализированных знаний физики и освоенных профильных дисциплин.	Требования ФГОС3+ (ПК-1, ПК-2)
P7	<u>Научно-инновационная деятельность</u> Применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований, а также	Требования ФГОС3+ (ПК-3,ПК-4,

	<p>профессиональные знания и умения в результате освоения профильных дисциплин для проведения физических исследований в инновационных областях науки, используя современные методы обработки, анализа и синтеза информации.</p>	ПК-5)
Р8	<p><u>Организационно-управленческая</u> Использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований, участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме, понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования</p>	Требования ФГОС3+ (ПК-6, ПК-7, ПК-8)
Р9	<p><u>Педагогически-просветительская</u> Проектировать, организовывать, анализировать педагогическую деятельность, владеть последовательностью изложения материала с использованием междисциплинарных связей физики с другими дисциплинами, участвовать в информационно-образовательных мероприятиях по пропаганде и распространению научных знаний</p>	Требования ФГОС3+ (ПК-9)

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа Инженерная школа ядерных технологий
Направление подготовки (специальность) 03.03.02 «Физика»
Отделение школы (НОЦ) Экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП
_____ Лидер А.М.
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Бакалаврской работы

(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
0Б51	Николаева Александра Владимировна

Тема работы:

Моделирование изменения структуры пучка углеродных нанотрубок при воздействии механического давления и газов	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	

Срок сдачи студентом выполненной работы:

--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<p>Молекулярно-динамическая модель системы жгут углеродных нанотрубок (УНТ) в атмосфере водорода.</p>
---	---

<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> - Аналитический обзор литературы по углеродным материалам и их свойствам; - Изучение метода молекулярной динамики и программного обеспечения LAMMPS; - Проведение моделирования: построение структур и реализация алгоритма для моделирования деформированного и недеформированного пучка в среде водорода; - Анализ полученных результатов; - Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение; - Социальная ответственность; - Заключение.
--	---

<p>Перечень графического материала</p> <p><i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	
--	--

<p>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</p> <p><i>(с указанием разделов)</i></p>

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Конотопский Владимир Юрьевич, к.э.н., доцент ОСГН ШБИП,
Социальная ответственность	Скачкова Лариса Александровна, Старший преподаватель ООД ШБИП

<p>Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:</p>
--

<p>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</p>	
--	--

Задание выдал консультант:				
Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель ОЭФ ИЯТШ	Чистякова Надежда Владимировна	к.ф-м.н		

Задание принял к исполнению студент:			
Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б51	Николаева Александра Владимировна		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
0Б51	Николаевой Александре Владимировне

Школа	ИЯТШ	Отделение школы (НОЦ)	Экспериментальной физики
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02 Физика

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Принять по действующим ценам
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	-
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	НДС и социальный налог

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Выполнить
2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	Выполнить
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	-

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Матрица SWOT
3. Альтернативы проведения НИ
4. График проведения и бюджет НИ
5. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Конотопский Владимир Юрьевич	К.Э.Н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б51	Николаева Александра Владимировна		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
0Б51	Николаевой Александре Владимировне

Школа	ИЯТШ	Отделение (НОЦ)	Экспериментальной физики
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	03.03.02 Физика

Тема ВКР:

Моделирование изменения структуры пучка углеродных нанотрубок при воздействии механического давления и газов	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	<p><i>Объектом исследования является молекулярно-динамическая модель системы жгут углеродных нанотрубок (УНТ) в атмосфере водорода. Симуляция происходит на ПЭВМ. Моделирование изменения структуры пучка нанотрубок в среде водорода используется для исследования материалов-накопителей.</i></p> <p><i>Работа проведена в компьютерном классе на четвертом этаже третьего корпуса ТПУ.</i></p>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: <ul style="list-style-type: none"> — специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; — организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<p><i>Приведение перечня ГОСТов:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> - Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ - ГОСТ 12.0.003-2015 - СанПиН 2.2.4.548-96. - СН2.2.4/2.1.8.562-96. - СНиП 23-05-95 - СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03. - ГОСТ 12.1.038-82.
2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	<p><i>В процессе выполнения работы возникли следующие факторы:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> - вредные проявления факторов производственной среды (метеоусловия, освещение, электромагнитные поля, шум) - опасные проявления факторов производственной среды (электрической, пожарной природы)
3. Экологическая безопасность:	<p><i>Приведение меры охраны окружающей среды от отходов бумаги</i></p>

4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	<ul style="list-style-type: none"> - приведение возможных чрезвычайных ситуаций (сильные морозы, диверсия); - разработка меры по предупреждению чрезвычайных ситуаций; - разработка действий в результате возникшей чрезвычайной ситуации и меры по ликвидации ее последствий
--	--

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
--	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель ООД ШБИП	Скачкова Лариса Александровна			

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б51	Николаева Александра Владимировна		

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Уровень образования Бакалавриат

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Экспериментальной физики

Период выполнения _____

Форма представления работы:

Бакалаврская работа

(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН

выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.03.2018	Аналитический обзор литературы	15
01.09.2018	Объект и методы исследования	15
30.12.2018	Моделирование воздействия атмосферы водорода на пучок нанотрубок и моделирование прессования пучка нанотрубок при приложенном механическом давлении в среде водорода	20
30.04.2019	Анализ результатов	15
25.05.2019	Социальная ответственность	15
25.05.2019	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
25.05.2019	Заключение	5

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель ОЭФ	Чистякова Надежда Владимировна	к.ф.-м.н		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель отделения ЭФ ИЯТШ	Лидер Андрей Маркович	д.т.н., доцент		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 72 с., 16 рис., 15 табл., 44 источника.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, углеродный материал, пучок нанотрубок, водород, сорбция.

Объектом исследования является молекулярно-динамическая модель системы жгут углеродных нанотрубок (УНТ) в атмосфере водорода.

Цель работы – моделирование изменения структуры пучка нанотрубок под воздействием механического давления и водорода

В процессе исследования проводилось моделирование воздействия атмосферы водорода при давлениях 1, 4, 50, 100, 200 бар на пучок недеформированных нанотрубок, а также моделирование прессования пучка нанотрубок и определение их сорбционной способности. Определены весовые содержания водорода моделируемыми углеродными структурами. при температуре 300 К.

В результате исследования установлено, что деформация пучка УНТ приводит к понижению его сорбционных способностей. Максимальная сорбция составила 1,6 вес. % для недеформированных УНТ при давлении 200 бар и $T = 300\text{ К}$.

Оценка сорбции водорода моделируемыми углеродными структурами согласуется с экспериментальными данными.

Результаты исследований могут быть использованы для исследования свойств материалов-накопителей, так как управление структурой материала позволит влиять на их сорбционные свойства.

Оглавление

Введение	13
Глава 1 Углеродные материалы и их свойства	15
1.1 Структура углеродных нанотрубок	15
1.2 Обзор исследований поведения нанотрубок под давлением	19
1.3 Сорбция водорода углеродными нанотрубками	26
Глава 2 Метод моделирования изменения структуры пучка УНТ при воздействии давления и газов	29
2.1 Метод молекулярной динамики	29
2.2 Межатомный потенциал	30
2.3 Программное обеспечение LAMMPS	31
2.4 Особенности программы LAMMPS	32
Глава 3 Моделирование поведения пучка нанотрубок под воздействием внешнего давления и газов	35
Глава 4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	41
4.1 Составление списка работ	41
4.2 Длительность этапов работ	42
4.3 Расчет сметы затрат на выполнение проекта	46
Расчет сметы затрат на выполнение проекта представлен в таблице 5.	46
4.3.1 Расчет заработной платы	46
4.3.2 Расчет затрат на социальный налог	47
4.3.3 Расчет затрат на электроэнергию	47
4.3.4 Расчет амортизационных расходов	48
4.3.5 Расчет расходов, учитываемых непосредственно на основе платежных документов (кроме суточных)	49
4.3.6 Расчет прочих расходов	49
4.3.7 Расчет общей себестоимости разработки	50
4.3.8 Расчет прибыли	50
4.3.9 Расчет НДС	50
4.3.10 Цена разработки проекта	51
4.4 Оценка экономической эффективности проекта	51
4.5 Вывод	51
Глава 5 Социальная ответственность	52
5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	52
5.1.1 Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства.	52

5.2 Производственная безопасность. Анализ вредных факторов производственной среды	54
5.2.1. Микроклимат	55
5.2.2 Производственный шум	57
5.2.3 Электромагнитные поля	59
5.2.4 Освещенность	60
5.3 Анализ опасных факторов производственной среды	62
5.3.1 Электробезопасность.....	62
5.3.2 Факторы пожарной и взрывной природы	63
5.4 Охрана окружающей среды	66
5.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях	66
5.6 Вывод.....	67
Заключение	68
Список литературы	69

Введение

Начало нового тысячелетия предстает перед нами бесчисленными возможностями и проблемами. С одной стороны, развитие социальной экономики и культуры приносит многим из нас высокий уровень жизни; с другой стороны, растет обеспокоенность общественности по поводу глобальной экологической проблемы, вызванной использованием ископаемого топлива и чрезмерной зависимости экономики от него. Поэтому ведется поиск возможных альтернативных источников энергии для замены ископаемого топлива. В большинстве случаев новые первичные источники энергии не могут быть использованы напрямую, т. е. используются в качестве топлива для перевозки. Следовательно, альтернативная энергетика имеет проблему безопасного обратимого хранения энергии, которую можно запасть по-разному, например, накапливать газообразный водород и т.д. Для того чтобы решить эту проблему необходимы новые виды энергетических материалов.

Углеродные наноматериалы являются многообещающим материалом кандидатом в качестве накопителя энергии. К таким материалам можно отнести графен, фуллерен, углеродные нанотрубки. Т. о. развитие альтернативной энергетики связано с применением углеродных наноматериалов, которые являются перспективными материалами-накопителями водорода.

В данной работе используется классический метод молекулярной динамики, т. к. ввиду сложности получения материалов-накопителей, большое значение приобретают методы моделирования, которые позволяют выбрать и категорировать материалы для их дальнейшего использования, а также поставить задачи для ученых экспериментаторов.

При исследовании свойств материалов-накопителей, важно учитывать их структуру, потому что от нее зависит сорбционная емкость. Управление структурой материала позволит влиять на их сорбционные свойства.

Исследование по литературным источникам показало, что работ, исследовавших изменение сорбции водорода при воздействии на структуру пучка углеродных нанотрубок в настоящее время нет, что делает выполняемую работу крайне актуальной с точки зрения исследования материалов - накопителей. Поэтому целью моей работы является моделирование изменения структуры пучка УНТ под воздействием механического давления и водорода.

Для достижения этой цели были поставлены следующие задачи:

1. Разработать алгоритм для моделирования воздействия атмосферы водорода на пучок УНТ;
2. Разработать алгоритм для моделирования прессования пучка нанотрубок при приложенном механическом давлении в среде водорода;
3. Оценить сорбцию водорода моделируемыми углеродными структурами.

Глава 1 Углеродные материалы и их свойства

1.1 Структура углеродных нанотрубок

Валентные электроны атома углерода имеют все три возможные гибридизации sp^1 , sp^2 , sp^3 , благодаря которым существуют твердотельные аллотропные модификации углерода (карбин, графит и алмаз) [1]. Углеродные нанотрубки формируются sp^2 -гибридизацией [2].

ОУНТ можно представить как цилиндр свернутого графенового листа (рисунок 1), который представляет собой монослой атомов углерода в сотовой структуре. В сечении нанотрубки могут иметь круглую, овальную или уплощенную форму.

Одностенные нанотрубки имеют вид графеновых цилиндров диаметром от 0,7 – 10 нм. Малые размеры влияют на их электронные и оптические свойства.



Рисунок 1 – Общий вид однослойной углеродной нанотрубки [3]

Структура и электронные свойства ОУНТ определяются способом свертки графенового листа. На рисунке 2 показана структура сотового графена

в реальном пространстве с единичными векторами \vec{a}_1 и \vec{a}_2 и вектором хиральности \vec{C}_h .

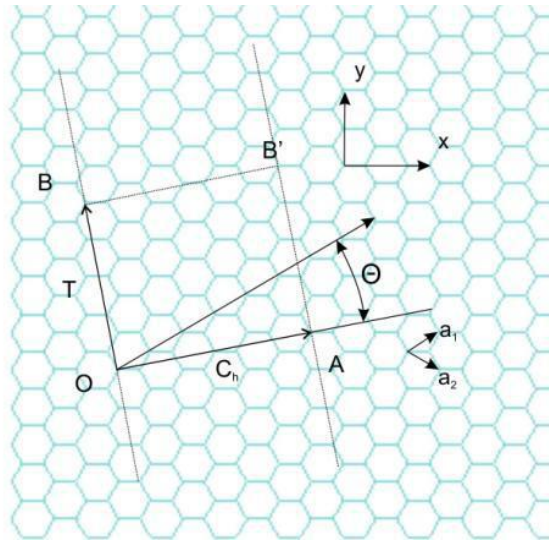


Рисунок 2 – Сотовая структура листа графена в реальном пространстве [4]

Вектор хиральности \vec{C}_h лежит в плоскости сечения нанотрубки перпендикулярно ее оси. Чтобы получить модель углеродной нанотрубки необходимо свернуть лист графена так, чтобы совпали точка О с А и точка В с В'.

Структуру УНТ чаще всего представляют как плоскость графена, разрезанная вдоль пунктирных линий, перпендикулярных \vec{C} , и свернутая в направлении \vec{C} в длинный цилиндр, так что длина $|\vec{C}|$ становится окружностью. Вектор хиральности однозначно определяет структуру ОУНТ и выражается формулой 1:

$$\vec{C} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (1)$$

где n и m являются целыми числами.

Индексы хиральности (n, m) являются координатами радиус-вектора \vec{C} в заданной на графеновой плоскости косоугольной системе координат,

определяющего ориентацию оси трубки относительно графеновой плоскости и ее диаметр по формуле 2:

$$d = \frac{\sqrt{3}a_{c-c}\sqrt{n^2+m^2+nm}}{\pi} \quad (2)$$

где a_{c-c} – расстояние между соседними атомами углерода, известное как 0,142 нм.

На рисунке 3а и 3б представлены типы нанотрубок, относящихся к нехиральным УНТ. На рисунке 3а представлена нанотрубка типа «кресло» с вектором хиральности (n, n) . Нанотрубка типа «зигзаг» с вектором хиральности $(n, 0)$ представлена на рисунке 3б [1]. Зеркальные изображения рассмотренных УНТ совпадают с ними самими. На рисунке 3в представлена хиральная нанотрубка с индексами (n, m) , ее зеркальное изображение не может быть совмещено с ней самой. Индексы n и m для хиральных нанотрубок принимают значения в диапазоне: $0 < |m| < n, n \in \mathbb{N}$.

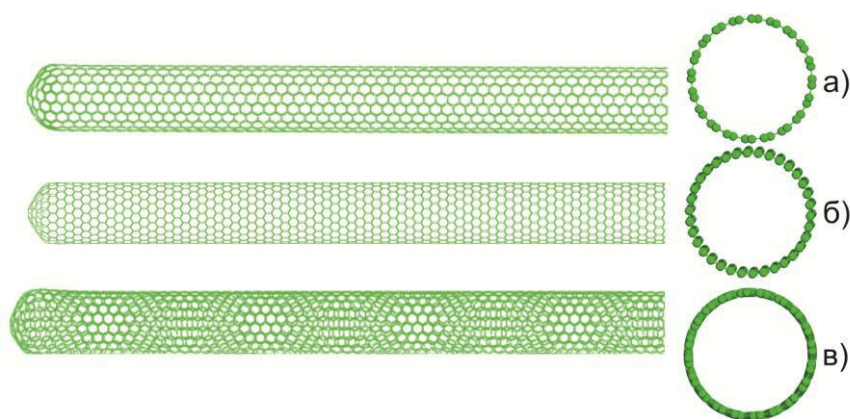


Рисунок 3 – Виды нанотрубок в зависимости от направления «сворачивания»: а) «кресельная»; б) «зигзаг»; в) «хиральная» [4]

Нанотрубки типа «кресло» всегда металлические, а зигзагообразные трубки могут быть полупроводниковыми или металлическими. Это полезные структуры, которые часто появляются в теоретической работе из-за их высокой степени симметрии, которая упрощает вычисления. На практике ОУНТ

представляют собой семейство множества различных структур с различными электронными и оптическими свойствами.

Структура, состоящая из нескольких слоев графена свернутых в трубку с расстоянием между ними 0,34 нм, называется многослойной нанотрубкой.

На рисунке 4 представлены две модели многослойных нанотрубок. Модель «матрешка» это несколько однослойных нанотрубок, вложенных одна в другую (рисунок 4а). Модель «свиток» похожа на лист графена, который обернули несколько раз вокруг себя (рисунок 4б). Нанотрубки не образуют шва в месте соединения при многослойном сворачивании [5].

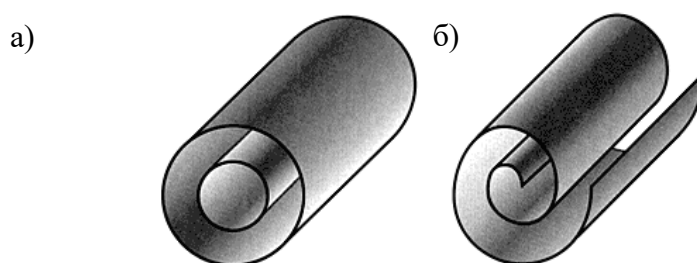


Рисунок 4 – Модели многослойных нанотрубок»:

а) русская матрешка; б) свиток [5]

Определить точные физические свойства нанотрубок очень сложно, потому что, хотя наука способна воссоздать эти нанотрубки, увидеть их под микроскопом сложно - потому что они очень маленькие, а также из-за структуры углеродных нанотрубок.

Структура углеродных нанотрубок остается загадкой во многих отношениях, потому что углеродные нанотрубки представляют собой сложное природное явление, которое невозможно полностью контролировать. Хотя наука имеет представление о физических свойствах углеродных нанотрубок на базовом уровне, еще многое предстоит узнать о структурных последствиях углеродных нанотрубок не только для науки, но и для повседневной жизни.

1.2 Обзор исследований поведения нанотрубок под давлением

В экспериментальной работе [6] ученые измеряли спектры времени жизни позитронов в сжатых углеродных нанотрубках. На рисунке 5 показано, что время жизни позитронов в ОУНТ уменьшается по мере увеличения давления.

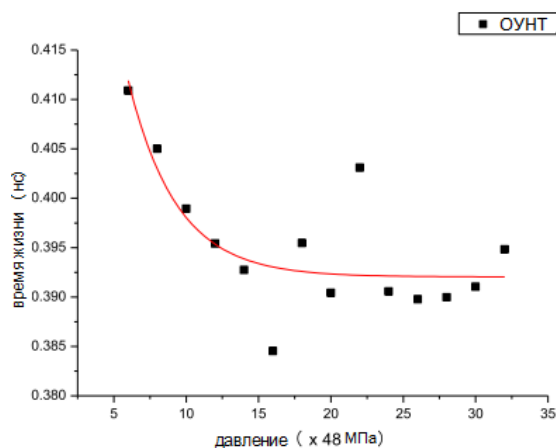


Рисунок 5 – Зависимость времени жизни позитронов ОУНТ от давления [6]

Значения времени жизни позитронов приблизительно уменьшаются по экспоненте, так как давление постепенно возрастает в диапазоне 6×48 МПа $\sim 16 \times 48$ МПа. После давления 20×48 МПа время жизни позитронов приближается к постоянному значению. Авторы заключают, что в образцах позитроны аннигилируют электронами либо внутри нанотрубок, либо на их внешней поверхности. Когда образцы сжимают, внешнее пространство нанотрубок уменьшается, тогда возрастает плотность электронов, что приводит к уменьшению времени жизни позитронов. В диапазоне давлений 20×48 МПа $\sim 32 \times 48$ МПа, внешнее пространство нанотрубок не изменяется. Таким образом, продолжительность жизни позитронов остается постоянной.

В расчетной работе [7] для исследования многостенных углеродных нанотрубок использовалась спектроскопия времени жизни позитронов. В этом

исследовании была установлена корреляция между временем жизни позитронов и средним диаметром нанотрубок (рисунок 6), полученных методом термического CVD. Эксперимент показал, что время жизни уменьшается по мере увеличения среднего диаметра нанотрубок. Результаты также показывают зависимость диаметра нанотрубки от вероятности позитронной аннигиляции на внешних поверхностях нанотрубок. Проведенное исследование может способствовать лучшему пониманию позитронной аннигиляции в МУНТ, и полученные результаты будут применены для лучшего контроля процесса синтеза нанотрубок.

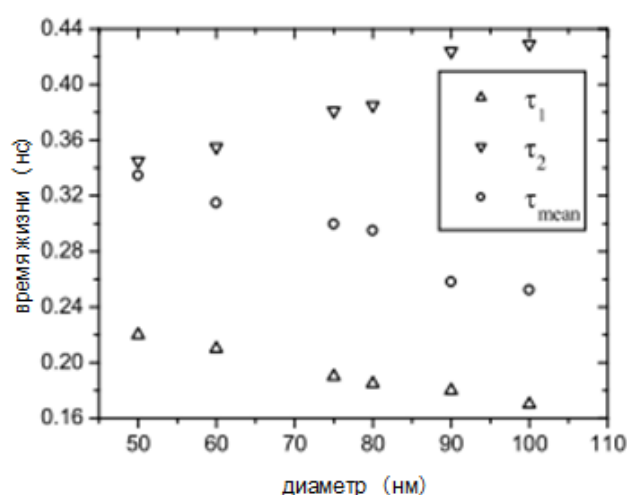


Рисунок 6 – Зависимость времени жизни позитронов от среднего диаметра нанотрубок [7]

В работе [8] ученые с помощью классической молекулярной динамики демонстрируют, что одностенные углеродные нанопучки из нанотрубок (ОУНТ) разрушаются под гидростатическим давлением. В данной работе было обнаружено, что давление сжатия зависит от диаметра нанотрубки и не зависит от ее хиральности. Также был установлен наименьший диаметр ОУНТ при котором они остаются недеформированными при атмосферном давлении ($d > 4,16$ нм).

Чтобы исследовать влияние диаметра на давление сжатия, было выполнено моделирование нанотрубок разных диаметров. Наблюдалось явное снижение давления сжатия при увеличении диаметра нанотрубки, как показано на рисунке 7.

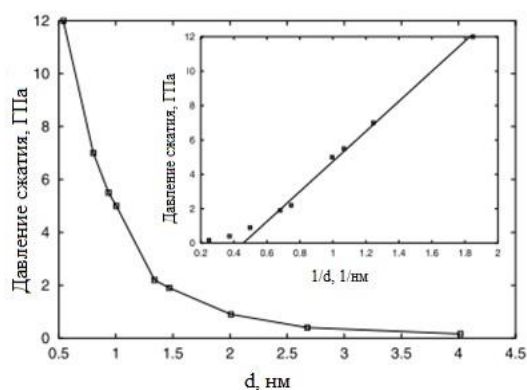


Рисунок 7 – График зависимости давления сжатия пучков ОУНТ от диаметра нанотрубок [8]

В данной работе ученые определили, что давление разрушения составляет около 6,1 ГПа. В результате моделирования, было выявлено поведение пучка нанотрубок под давлением до 10 ГПа. ОУНТ меньшего диаметра разрушаются при давлении $6,6 \pm 0,8$ ГПа, в то время как нанотрубки большего диаметра разрушаются при меньшем давлении $2,1 \pm 0,2$ ГПа. Зависимость давления сжатия от диаметра указывает на ограниченную стабильность ОУНТ. Также было установлено, что критический диаметр при атмосферном давлении лежит между 4,2 и 6,9 нм. Данное исследование может быть пригодным для изучения других наномеханических применений нанотрубок.

В работе [9] были исследованы структурные превращения пучка одностенных углеродных нанотрубок (10,10) в ответ на внешнее давление с помощью первопринципных расчетов. Было выявлено, что под давлением круглая форма нанотрубки сначала преобразуется в эллиптическую, чему

способствует тепловое движение атомов углерода, нарушающее ограничение симметрии треугольной решетки. При этом пустое пространство внутри трубки сжимается, что приводит к уменьшению отталкивания сил Ван-дер-Ваальса между трубками. В данной статье ученые определили, что УНТ (10,10) должна быть круглой в реальном эксперименте сжатия. Результаты первопринципных расчетов подтверждают интерпретацию перехода от круглого сечения к эллиптическому, а не к гексагональному. При дальнейшем сжатии эллиптическая структура Е деформируется в структуру С (рисунок 8). Кроме того, каждое плоское сечение в С и D можно рассматривать как лист графена. Кроме того, поверхности сечений графена в С и D слегка деформированы из-за межтрубных взаимодействий в периодической двумерной решетке. Таким образом, симметрия трубки снижается из-за сильного отталкивания между нанотрубками. Также было выяснено, что структуры с шестигранными сечениями труб являются метастабильным состоянием из-за ограничения симметрии треугольной решетки. Такое сечение слишком жесткое, чтобы уменьшить объемы трубы и отталкивание между трубками Ван-дер-Ваальса.

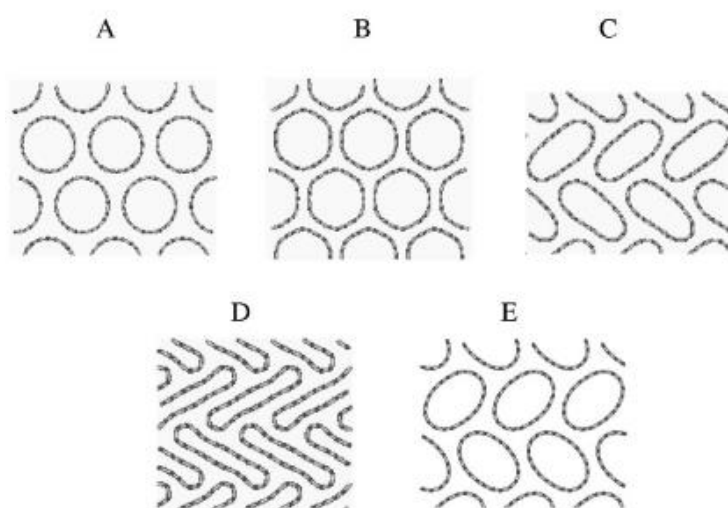
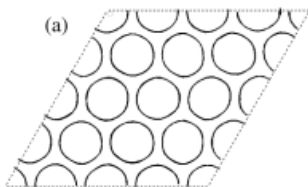

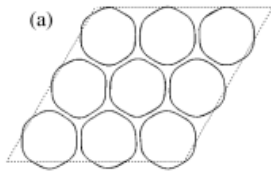
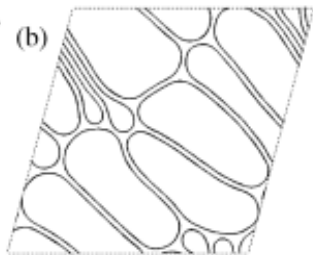


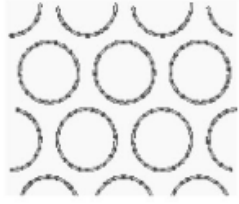
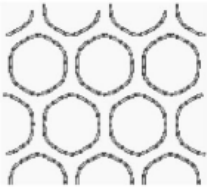
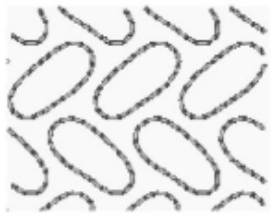
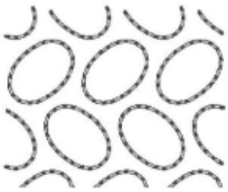
Рисунок 8 – Структурные превращения пучка ОУНТ (10,10) в ответ на внешнее давление [9]

В таблице 1 представлены структуры ОУНТ при разных давлениях.

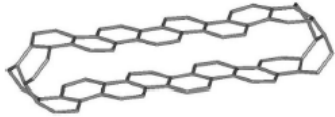
Таблица 1 – Вид структуры ОУНТ при разных давлениях

0,1 ГПа	 <p>[8]</p>	Круглая форма УНТ
3 ГПа	 <p>[8]</p>	Степень упорядоченности в структуре «елочка» связана с числом независимых труб в пучке, и может сильно отличаться для конечного пучка, но давление сжатия остается неизменным для тех пучков, которые содержат более девяти независимых нанотрубок
Атмосферное давление, (30,30) $d=4,16$ нм	 <p>[8]</p>	На рисунке показано преобразование структуры пучка (жгута) (а) в структуру (б). Изучение траекторий моделирования позволяет предположить, что механизм сжатия начинается с воздействия одной
Атмосферное давление, (50,50) $d=6,94$ нм	 <p>[8]</p>	трубки на другую, что в конечном итоге приводит к сжатию всего пучка. Ученые данной статьи утверждают, что давление сжатия отдельных нанотрубок отличается от давления внутри пучка

Продолжение таблицы 1

<p>(10,10)</p> <p>0,2 ГПа</p>	<p>А</p>  <p>[9]</p>	<p>Кристаллический пучок УНТ. Круглая форма УНТ</p>
<p>(10,10)</p> <p>10,6 ГПа</p>	<p>В</p>  <p>[9]</p>	<p>При сжатии круговая структура А преобразуется в шестиугольную структуру В. Данная структура является метастабильной из-за ограничения симметрии решетки</p>
<p>(10,10)</p> <p>2,3 ГПа</p>	<p>С</p>  <p>[9]</p>	<p>При дальнейшем сжатии с резким падением энергии обнаруживается сплюснутая структура. Расчетное напряжение показывает резкое падение с 10,6 ГПа для гексагональной В до 2,3 ГПа для сплюснутой С, даже если элементарная ячейка немного уменьшена</p>
<p>(10,10)</p> <p>4 ГПа</p>	<p>Е</p>  <p>[9]</p>	<p>Эллиптическая структура</p>

Продолжение таблицы 1

<p>(10,10)</p> <p>21 ГПа</p>	<p>D</p>  <p>[9]</p>	<p>При повышении давления сжатия наблюдается сплюснутая структура</p>
<p>(10,10)</p> <p>12,5 ГПа</p>	 <p>[9]</p>	<p>Сплюснутый пучок нанотрубок (10,10). Расстояние между двумя плоскими участками графена составляет около 3,8 Å для данной структуры при таком высоком давлении. Это расстояние приближается к межслоевому расстоянию 3,35 Å</p>

В результате моделирования в работе [10] было установлено, что поперечное сечение ОУНТ под давлением переходит от круглой к эллиптической форме. На рисунке 9 показана эволюция формы поперечного сечения с ростом давления для нанотрубки (10,10).

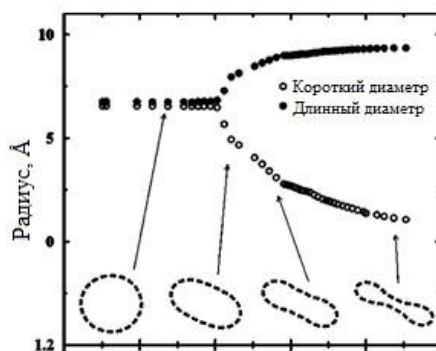


Рисунок 9 – Эволюция формы поперечного сечения ОУНТ (10,10) [10]

Ученые установили, что ниже переходного давления, 1,0 ГПа нанотрубки имеют круглую форму. Выше 1,0 ГПа поперечное сечение преобразуется в эллиптическую форму, которая претерпевает переход к форме гантели, как показано на рисунке 9. При еще более высоком давлении форма гантели может стать настолько плоской, что расстояние между противоположными боковыми стенками приближается к расстоянию между слоями в графите $\sim 3,35 \text{ \AA}$. Следовательно, между боковыми стенками будет иметь место дополнительное Ван-дер-Ваальсово взаимодействие, которое может привести к разрушению трубки. Такой эффект более выражен для труб с большими радиусами. Моделирование показывает, что критическое давление уменьшается с увеличением радиуса нанотрубки.

1.3 Сорбция водорода углеродными нанотрубками

Углеродные нанотрубки обладают хорошими сорбционными свойствами благодаря высокой удельной площади поверхности, которая достигает $2000 \text{ м}^2/\text{г}$ для одностенных углеродных нанотрубок. Чем больше удельная поверхность наноматериала, тем выше сорбционная способность. Капиллярные свойства нанотрубки проявляются на нанометровом масштабе, так как диаметр внутреннего канала УНТ всего в 2-3 раза превышает характерный размер молекулы.

Нанотрубка способна обратимо поглощать газообразные и конденсированные вещества своей внутренней полостью при благоприятных условиях. Поэтому степень заполнения внутренней полости нанотрубки молекулами водорода может быть больше значения, полученного при поверхностной физической сорбции [11].

В работе [12] учеными были проведены эксперименты по поглощению водорода углеродными нанотрубками и нановолокнами. Приводились измерения адсорбционной способности водорода специально приготовленной

сажи, которая составила 0,1 - 0,2 масс. % при 133 К. Расчет адсорбции водорода чистыми ОУНТ составил 5 - 10 масс. %. Ученые сделали вывод, что для ОУНТ с диаметром от 1,63 до 2 нм сорбция водорода равна 6,5 масс. %.

В экспериментальной работе [13] ученые установили, что при криогенной температуре 80 К и давлении 12 МПа ОУНТ адсорбирует 8 масс. % водорода, а в работе [14] другие ученые утверждают, что при комнатной температуре и при том же давлении углеродные нанотрубки способны адсорбировать свыше 11 масс. % водорода.

В работе [15] команда ученых обнаружила большую адсорбцию H_2 для литий-легированных и калий-легированных МУНТ при нормальном давлении, которая составила 20 и 14 вес. %, соответственно. В калий-легированных многослойных углеродных нанотрубках адсорбция водорода происходила при комнатной температуре, их недостаток в том, что они химически неустойчивы, Литий-легированные МУНТ химически стабильны, но требуют повышенных температур (от 473 до 673 К) для обеспечения максимальной адсорбции и десорбции H_2 .

В работе [16] ученые измеряли сорбцию ОУНТ с предполагаемой чистотой 50 вес. %, синтезированных методом дугового разряда. При комнатной температуре и умеренно высоком давлении сорбция водорода составила 4,2 масс. %. Кроме того, 80% адсорбированного водорода было освобождено при комнатной температуре. Эти результаты указывают на то, что ОУНТ весьма перспективны для адсорбции водорода даже при комнатной температуре.

В работе [17] ученые выяснили, что при выдержке упорядоченных пучков чистых, открытых УНТ в атмосфере водорода, адсорбция молекул газа происходит как в межтрубном пространстве внутри пучка, так и внутри каждой нанотрубки. При адсорбции внутри нанотрубок частицы покрывают сначала ее внутреннюю стенку, формируя цилиндрическую газовую фазу; по достижении

определенной плотности адсорбированных молекул сформировавшаяся пленка затвердевает с локализацией адсорбированных частиц в решетке.

В теоретической работе [18] было промоделировано поведение молекул водорода внутри и снаружи широких ОУНТ (10,10) с диаметром $\approx 13,56 \text{ \AA}$ при различных температурах термодинамических свойств молекул водорода, взаимодействующих между собой и со стенками трубки через парные потенциалы взаимодействия и с учетом квантовых эффектов. Был произведен расчет плотности в весовых процентах содержания водорода в исследуемых нанотрубках. При увеличении внешнего давления и различных исследованных температурах плотность адсорбированных молекул водорода испытывает серию фазовых переходов. Этот эффект объясняется проявлением квантовых свойств у адсорбированных молекул водорода. Было установлено, что величина адсорбции внутри нанотрубок больше, чем снаружи. Максимальная величина адсорбции на обеих сторонах нанотрубок (10,10) достигает 2,9 вес. % при давлении 500 бар и $T=300 \text{ K}$.

На данный момент проведено множество исследований по сорбции водорода разными наноматериалами. Но при изменении структуры наноматериала его сорбционная способность может также меняться. Ранее это не было исследовано и данная работа посвящена этому исследованию.

Глава 2 Метод моделирования изменения структуры пучка УНТ при воздействии давления и газов

2.1 Метод молекулярной динамики

Метод молекулярной динамики это метод моделирования, рассчитывающий эволюцию системы взаимодействующих частиц путем интегрирования уравнений их движения. МД может быть классической или квантовой. В настоящей работе использовалась классическая молекулярная динамика, в которой движение системы частиц определяется вторым законом Ньютона (формула 3) [19]:

$$m_i \vec{a}_i = \vec{F}_i \quad (3)$$

где m_i – масса i -й частицы, $\vec{a}_i = d^2 \vec{r}_i / dt^2$ – ее ускорение, и $\vec{F}_i = -\nabla_i U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ – сила, действующая на нее. Силы взаимодействия между атомами представляют в форме классических потенциальных сил – силы Ван-дер-Ваальса. Ван-дер-Ваальсовая сила составляет все виды межмолекулярного притяжения и отталкивания. Ван-дер-Ваальсовая сила включает в себя кулоновские силы взаимодействия между электронами и ядрами одной молекулы и ядрами и электронами другой. Устойчивая система образуется, когда силы притяжения и отталкивания между молекулами уравниваются друг друга. Это происходит на определенном расстоянии. При больших расстояниях молекулы притягиваются. На малых же расстояниях молекулы отталкиваются из-за обменного взаимодействия.

Взаимодействия между атомами описываются потенциальной функцией $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$, где U – потенциальная энергия системы, N – количество атомов и r_N – координаты атомов. Для моделирования вещества необходимо определить положение атомов и силы между ними.

Эти силы определяются с помощью потенциала межатомного взаимодействия по формуле 4:

$$\vec{F} = -grad U(\vec{r}) \quad (4)$$

где F – сила взаимодействия двух атомов, $U(\vec{r})$ – потенциальная энергия взаимодействия двух атомов.

Для рассмотрения эволюции системы, нужно применять численный метод интегрирования дифференциальных уравнений. На основе начальных данных (скоростей и координат частиц) можно получить траектории всех частиц в любой последующий момент времени.

Ускорения частиц легко считаются через силы с помощью уравнения Ньютона (формула 5):

$$\vec{a}(t) = \frac{\vec{F}(\vec{r}(t))}{m} = -\frac{1}{m} \nabla U(\vec{r}(t)) \quad (5)$$

2.2 Межатомный потенциал

Потенциальная энергия взаимодействия двух атомов является функцией расстояния между ними. Атомы в решетках при определенных условиях могут сталкиваться и их столкновения очень похожи на столкновения упругих шаров. Таким образом, общая энергия системы атомов складывается из потенциальной энергии взаимодействия всех частиц между собой и суммы кинетических энергий атомов.

Все функции взаимодействия записываются в виде рядов значений по определенным правилам в отдельный файл, который называется «файлом потенциалов».

В данной работе учитывались три типа взаимодействия: взаимодействие молекул H_2 между собой; взаимодействие атомов C между собой; взаимодействие между молекулами H_2 и C . Эти взаимодействия описывались с помощью потенциала Airebo, который открыто доступен в программном обеспечении Sandia LAMMPS.

Этот потенциал имеет следующий вид (формула 6) [20]:

$$E_{Airebo} = E_{Rebo} + E^{LJ} + E^{Tors} \quad (6)$$

где первое слагаемое E_{Rebo} описывает взаимодействие ближайших атомов друг с другом (расстояние между атомами меньше 2 Å). Эти взаимодействия имеют сильную координационную зависимость через параметр порядка связи, который регулирует притяжение между атомами в зависимости от положения других ближайших атомов. Взаимодействие E_{ij}^{Rebo} имеет многочастичный характер и учитывает порядок химической связи атомов. Второе слагаемое E^{LJ} в формуле 4 является Леннард - Джонсовским взаимодействием, действующим на расстояниях $2 < x < 10,2$ Å. Последнее слагаемое E^{Tors} в формуле 4 представляет собой энергию торсионного взаимодействия.

Потенциал Airebo корректно описывает реакции углеводородов под высоким давлением. Он безошибочно описывает межмолекулярные отталкивания, при этом сохраняет термодинамику окружающей среды.

2.3 Программное обеспечение LAMMPS

В работе использовалась компьютерная программа LAMMPS, разработанная в национальной лаборатории Сандия, авторами которой являются С. Плимптон, Э. Томпсон, С. Мур и другие. LAMMPS – это программа классической молекулярной динамики, которая способна моделировать ансамбль частиц жидкого, газообразного и твердого состояний [21]. Чтобы в программе LAMMPS построить любую структуру из атомов, необходимо сначала задать расчетную область и заполнить ее атомами. Далее задаются условия моделирования и производится расчет. Для любых расчетов в молекулярной динамике, необходимо определить потенциал взаимодействия. LAMMPS имеет потенциалы для твердотельных материалов (металлов, полупроводников) и мягких веществ (биомолекул, полимеров) и

крупнозернистых или мезоскопических систем. Данный пакет способен реализовать крупные расчёты (больше миллиона атомов). В свободном доступе он существует в виде скомпилированных пакетов для Microsoft Windows.

LAMMPS имеет широкий функционал для построения структур, задания условий моделирования. Кроме того, программа поддерживает практически все известные типы потенциалов межатомного взаимодействия. Для моделирования в LAMMPS, необходимо написать программный код, с использованием собственного языка программы. Команды LAMMPS имеют несложный синтаксис и подробно описаны в справочнике.

2.4 Особенности программы LAMMPS

1. Можно скомпилировать версию LAMMPS для запуска как в однопроцессорном, так и в многопроцессорном режиме;
2. LAMMPS поддерживает двухчастичные и многочастичные потенциалы
(потенциалы Леннарда-Джонса, Морзе, Airebo);
3. Для расчета сил в системах с кулоновским взаимодействием реализованы методы Эвальда и PPPM (Particle-particle particle-mesh);
4. LAMMPS записывает атомные конфигурации в текстовый файл. Начальное состояние атомов для расчета может быть как сгенерировано в программе, так и считано из текстового файла;
5. Использование графических процессоров для расчета.
6. Команды LAMMPS можно записать в любом текстовом редакторе. Рекомендуется WordPad. Текстовый файл можно сохранить с любым расширением, а потом запустить в командной строке (например, программы FAR).

Программа для LAMMPS содержит 5 основных частей:

1. Инициализация

2. Определение структуры и типов атомов
3. Задание потенциала взаимодействия
4. Установка условий для моделирования и вывода данных
5. Запуск моделирования

1. Инициализация

Установка параметров, которые должны быть определены до создания атомов и структуры.

units - Набор единиц измерения

dimension - Размерность пространства, возможно 2d

boundary - Граничные условия

2. Определение атомов

Кристаллическую решетку и атомы можно определить с помощью следующих команд.

lattice - Тип решетки

region - Задать область пространства

create_box - Задать размер и форму исходной области моделирования

create_atoms - Создать атомы

Размер и форма могут быть изменены с помощью последующих запусков моделирования, например, используя команды fix npt или fix deform, определяющих условия моделирования.

3. Задание потенциала взаимодействия

В LAMMPS можно задавать разные потенциалы. Они определяются с помощью следующих команд.

pair_style - Тип потенциала

pair_coeff – Коэффициенты

Команда pair_coeff указывает потенциальный файл с параметрами для атомов.

4. Установки (Settings)

В этом разделе определяются команды, которые определяют условия, при которых ведется расчет – давление, температура, тип процесса – изохорный, изобарный, изотермический и т.п. Кроме того устанавливается тип вывода данных – переменные, картинки, видео.

fix - Тип процесса

thermo - Устанавливает параметры вывода в процессе расчета

dump - Вывод данных в файл: цифры, картинки, видео

5.Запуск моделирования

run - Основная команда для запуска моделирования

Кроме того, существует команда для МД расчета структуры с минимальной энергией – minimize.

Глава 3 Моделирование поведения пучка нанотрубок под воздействием внешнего давления и газов

В программе VMD [22] построили ОУНТ (10,10) – типа «кресло» диаметром 13,5 Å и длиной 290 Å, концы трубки открыты. Для создания пучка углеродных нанотрубок данную трубку импортировали в LAMMS с помощью команды `read_data`.

Расчет проведен при помощи кода LAMMPS для системы углеродных нанотрубок, гексагонально упакованных в периодическую ячейку с триклинной геометрией. В модели пучок УНТ состоит из 7 нанотрубок, ориентированных вертикально вдоль оси z , так как жгуты УНТ растут вертикально вверх на каталитической подложке. Ширина пучка равна 46,5 Å, с межтрубным расстоянием 3 Å (рисунок 10).

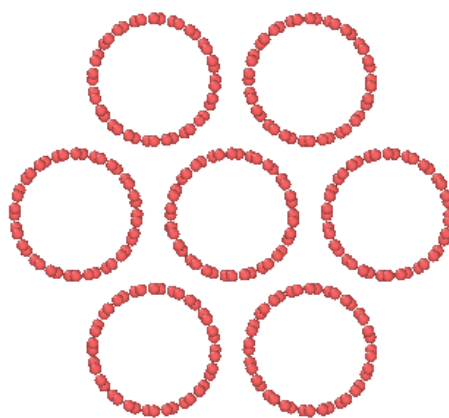


Рисунок 10 – Пучок нанотрубок

Для описания взаимодействия атомов углерода между собой в углеродных нанотрубках и между ними использован многочастичный потенциал *Airebo*. Данный потенциал корректно описывает взаимодействие молекул водорода между собой и взаимодействие H_2 -C.

Алгоритм для моделирования пучка УНТ в атмосфере водорода состоит из:

1. Построении пучка из 7 углеродных нанотрубок;
2. Геометрической оптимизации модели при помощи команды minimize 1.0e-4 1.0e-6 100 1000;
3. Релаксации при комнатной температуре 300 K: velocity all create 300 12345 mom yes rot no;
4. Моделирования молекул водорода вокруг пучка УНТ;
5. Затем происходит геометрическая минимизация системы и ее релаксация при комнатной температуре;
6. Проводилось 5 расчетов для разных давлений газа: для 1, 4, 50, 100 и 200 бар.
7. Далее оценивалась сорбционная способность пучка при этих давлениях и комнатной температуре.

На рисунке 11 представлен пучок нанотрубок в атмосфере молекул водорода при давлении 20 бар и 300 К на первом шаге моделирования.

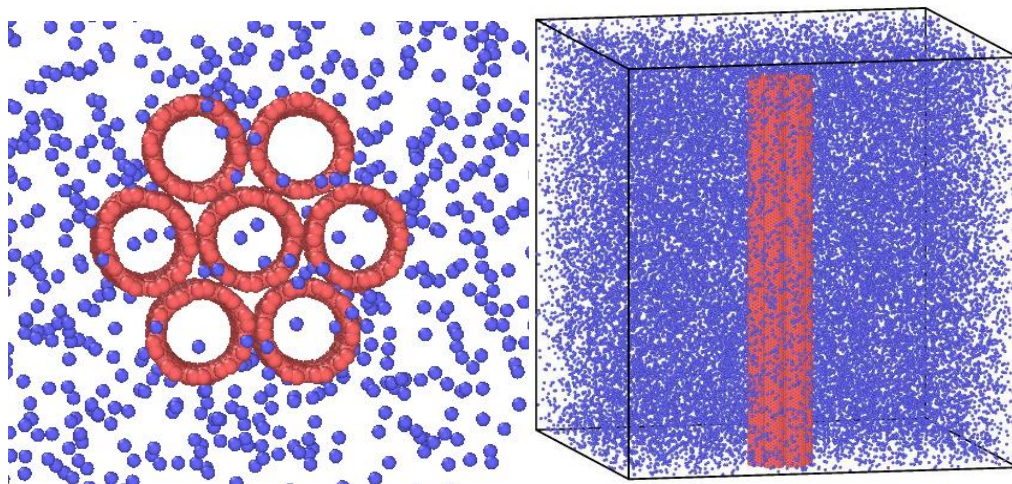


Рисунок 11 – Модель пучка УНТ в водородной атмосфере при давлении 20 бар и 300 К на первом шаге моделирования

Алгоритм подсчета количества молекул водорода, адсорбированных на поверхности и во внутренней полости жгута нанотрубок состоит в геометрическом определении числа молекул водорода лежащих в пределах цилиндра с радиусом, превышающим на 0,3 нм радиус жгута нанотрубок [23]. Данный подсчет сорбции был реализован с помощью функций пакета Ovito [24].

На рисунке 12 представлена система жгут УНТ - H_2 в случае сорбции на внешней и внутренней поверхности нанотрубок.

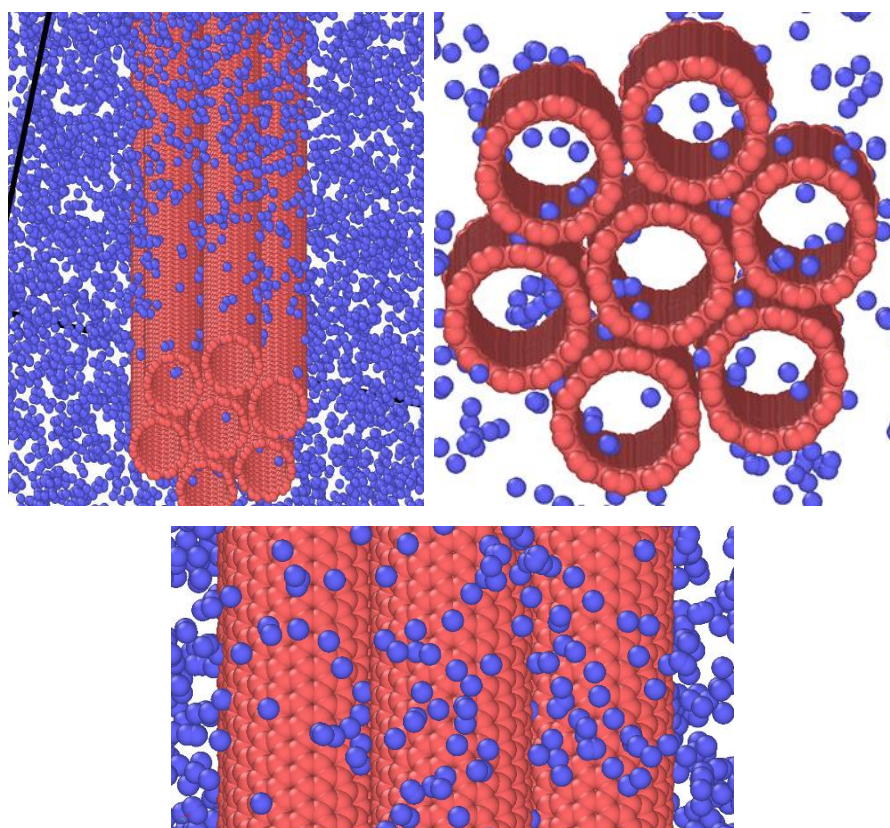


Рисунок 12 – Модель сорбции H_2 пучком УНТ при 20 бар и $T=300$ К на последнем шаге моделирования

Результаты первой серии расчетов представлены на графике (рисунок 13). Сравнение данных полученных расчетов с работой [18] показывает, что в настоящем расчете из-за отсутствия учета квантовых явлений массовая

концентрация водорода, адсорбированного стенками и внутренней полостью жгута нанотрубок, оказывается несколько ниже, приведенной в статье [18].

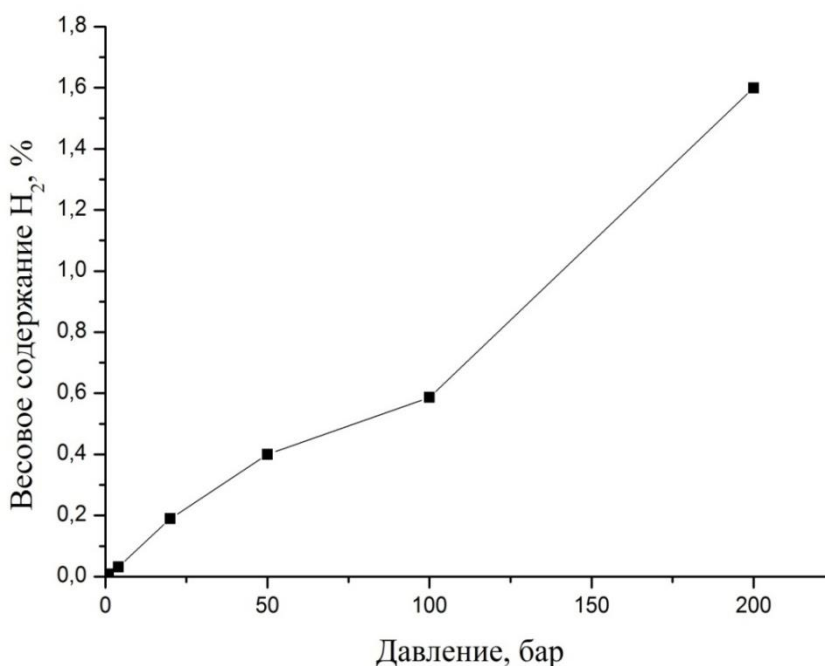


Рисунок 13 – Весовое содержание адсорбированного водорода недеформированным пучком УНТ

Для исследования зависимости сорбции H_2 от структуры УНТ необходимо провести ту же симуляцию, но со сжатыми трубками. Для этого пучок углеродных нанотрубок был деформирован при помощи команды *wall/piston*, которая смещает атомы, а не прикладывает к ним силу. Симуляция этим методом связана с движением поршня бесконечной массы, отражающим частицы в указанной группе. Команда *wall/piston* создает поршень способный двигаться только вдоль оси z . Поэтому в LAMMPS мы создали поршень, движущийся с постоянной скоростью в положительном направлении z . Так как созданный ранее пучок ориентирован так же, как и поршень вдоль оси z , следовательно, деформации не будет. Трубки будут уменьшаться вдоль оси z в длине. Следовательно, необходимо сделать ориентацию трубок вдоль оси x или y . Мы сделали это используя программу *Atomsk* [25]. В начальный момент

времени с помощью команды `read_data` в расчетную область импортировали повернутую УНТ и создали такой же пучок из 7 трубок. По всем осям кроме z вводим периодические граничные условия. Всем атомам расчетной области задавалась температура 300 К. Давление поршня, оказываемое на пучок нанотрубок равно 40 МПа.

Далее деформированный пучок поместили в атмосферу молекул водорода (рисунок 14), после чего оценили его сорбционную способность при давлениях газа 1, 4, 50, 100, 200 бар (рисунок 15).

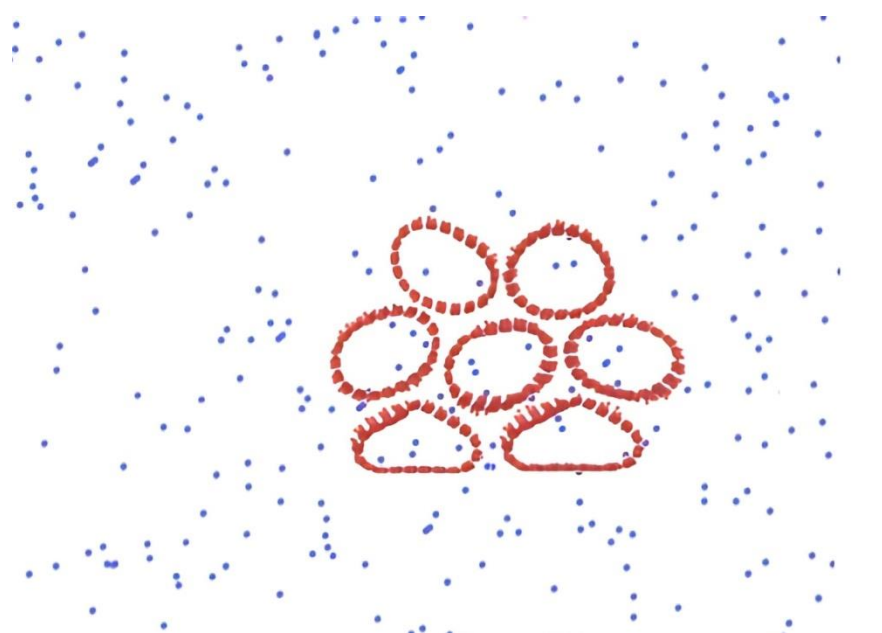


Рисунок 14 – Жгут деформированных углеродных нанотрубок в атмосфере водорода

В случае применения техники поршня нанотрубки деформируются, их круглая структура преобразуется в эллиптическую, как в статье [9]. Из рисунка 14 видим, что в результате сжатия пучка УНТ уменьшается объем сводного пространства как внутри, так и снаружи трубок.

Результаты второй серия расчетов представлены на графике (рисунок 15).

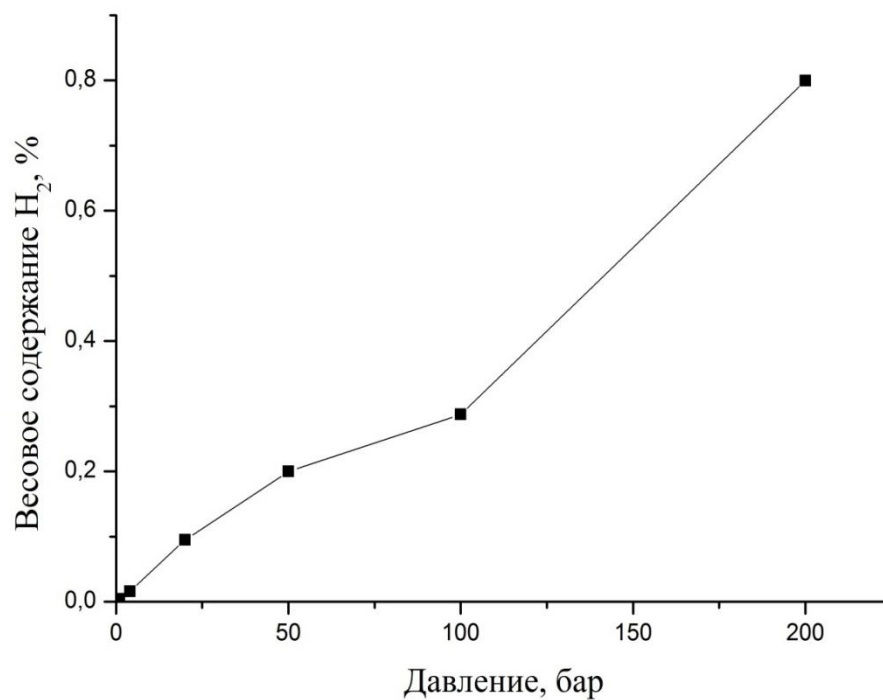


Рисунок 15 – Весовое содержание адсорбированного водорода деформированным пучком УНТ

Результаты моделирования показали, что количество адсорбированного водорода на деформированных нанотрубках несколько меньше, чем на недеформированных, что может быть связано в первую очередь с напряженно-деформированным состоянием таких трубок, а также уменьшением областей концентрации молекул водорода.

Глава 4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

4.1 Составление списка работ

Оценка трудоемкости выполнения ВКР носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов.

Этапы выполнения дипломной работы представлены в таблице 2:

Таблица 2 – Список работ и длительность их выполнения

Этапы работы	Исполнители	Загрузка исполнителей
1.Получение задания на НИР	НР	НР – 100%
2.Постановка целей и задач, получение исходных данных	НР, И	НР – 100% И – 50%
3.Составление и утверждение ТЗ	НР, И	НР – 100% И – 10%
4.Подбор и изучение материалов по тематике	НР, И	НР – 30% И – 100%
5.Разработка календарного плана	НР, И	НР – 100% И – 10%
6.Разработка моделей для исследования	НР, И	НР – 50% И – 100%
7.Поиск методов решения	И	И – 100%

Продолжение таблицы 2

8.Обобщение и оценка результатов	И	И – 100%
9.Оформление отчета по НИР	И	И – 100%
10.Оформление расчетно-пояснительной записки	И	И – 100%
11.Подведение итогов	НР, И	НР – 60% И – 100%

4.2 Длительность этапов работ

Рассчитаем ожидаемое время выполнения работ в человеко-днях по формуле 7:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot t_{min} + 2 \cdot t_{max}}{5} \quad (7)$$

где t_{min} – минимальная длительность работы, дн.;

t_{max} – максимальная длительность работы, дн.;

Для установления продолжительности этапов в рабочих днях воспользуемся формулой 8:

$$T_{РД} = \frac{t_{ож}}{K_{ВН}} \cdot K_{Д} \quad (8)$$

где $t_{ож}$ – длительность работы, дн.;

$K_{ВН}$ – коэффициент выполнения работ, учитывающий влияние внешних факторов на соблюдение предварительно определенных длительностей, $K_{ВН} = 1$;

$K_{Д}$ – коэффициент, учитывающий дополнительное время на компенсацию непредвиденных задержек и согласование работ, $K_{Д} = 1,2$.

Рассчитаем длительность каждого этапа в календарных днях по формуле 9:

$$T_{\text{КД}} = T_{\text{РД}} \cdot T_{\text{К}} \quad (9)$$

где $T_{\text{КД}}$ – длительность выполнения этапа в календарных днях;

$T_{\text{К}}$ – коэффициент календарности, рассчитываемый по формуле 10 [26]:

$$T_{\text{К}} = \frac{T_{\text{КАЛ}}}{T_{\text{КАЛ}} - T_{\text{ВД}} - T_{\text{ПД}}} \quad (10)$$

где $T_{\text{КАЛ}}$ – календарные дни ($T_{\text{КАЛ}} = 365$);

$T_{\text{ВД}}$ – выходные дни ($T_{\text{ВД}} = 52$);

$T_{\text{ПД}}$ – праздничные дни ($T_{\text{ПД}} = 10$).

$$T_{\text{К}} = \frac{365}{365 - 52 - 10} = 1,205$$

Результаты расчетов приведены в таблице 3

Календарный план работы в форме диаграммы Ганта представлен в таблице 4. График строится по таблице 3.

Таблица 3 - Трудозатраты на выполнение проекта

Этап	Исполнители	Продолжительность работ, дни			Трудоемкость работ по исполнителям чел.-дн.			
					$T_{РД}$		$T_{КД}$	
		t_{min}	t_{max}	$t_{ож}$	НР	И	НР	И
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Постановка задачи	НР	6	12	8,4	10,08	-	12,15	-
Разработка и утверждение технического задания (ТЗ)	НР, И	16	20	17,6	21,12	10,56	25,45	12,72
Подбор и изучение материалов по тематике	НР, И	3	6	4,2	5,04	0,5	6,07	7,31
Разработка календарного плана	НР, И	4	7	5,2	1,87	6,24	2,25	2,71
Обсуждение литературы	НР, И	7	18	11,4	13,68	1,67	16,48	19,86
Выбор структурной схемы устройства	НР, И	7	9	7,8	4,68	9,36	5,64	6,8
Выбор принципиальной схемы устройства	И	3	6	4,2	-	5,04	-	6,07
Расчет принципиальной схемы устройства	И	10	20	14	-	16,8	-	20,24
Оформление расчетно-пояснительной записки	И	16	18	16,8	-	20,16	-	24,29
Оформление графического материала	И	6	9	7,2	-	8,64	-	10,41
Подведение итогов	НР, И	9	12	10,2	7,34	12,24	8,84	14,75
Итого:		87	137	107	63,81	91,21	76,88	125,16

Таблица 4 - Календарный план проведения НИР

Этап	НР	И	Март			Апрель			Май			Июнь	
			10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	110
1	12,15	-											
2	25,45	12,72											
3	6,07	7,31											
4	2,25	2,71											
5	16,48	19,86											
6	5,64	6,8											
7	-	6,07											
8	-	20,24											
9	-	24,29											
10	-	10,41											
11	8,84	14,75											

НР ;

И

4.3 Расчет сметы затрат на выполнение проекта

Расчет сметы затрат на выполнение проекта представлен в таблице 5.

Таблица 5 – Расчет затрат на материалы

Наименование материалов	Цена за ед., руб.	Кол-во	Сумма, руб.
Бумага для принтера формата А4	2	150 листов	300
Картридж для принтера	1550	1 шт.	1550
Интернет	350	1 М/бит	350
Ручка	20	1 шт.	20
Тетрадь	60	1 шт.	60
Итого:			2280

Допустим, что ТЗР составляют 5 % от отпускной цены материалов, тогда расходы на материалы с учетом ТЗР равны $C_{\text{мат}} = 2280 * 1,05 = 2394$ руб.

4.3.1 Расчет заработной платы

Определим среднедневную тарифную заработную плату ($ЗП_{\text{дн-т}}$) по формуле 11:

$$ЗП_{\text{дн-т}} = MO/25,083 \quad (11)$$

при том, что в году 301 рабочий день (при шестидневной рабочей неделе в месяце в среднем 25,083 рабочих дня) [27].

В таблице 6 приведен расчет затрат на полную заработную плату. Пользуясь таблицей 3, получили длительность работы исполнителей в рабочих днях. Для учета в ее составе премий, дополнительной зарплаты и районной надбавки используем коэффициенты: $K_{\text{пр}} = 1,1$; $K_{\text{доп.ЗП}} = 1,188$; $K_{\text{р}} = 1,3$ (при

шестидневной рабочей неделе). Таким образом, для перехода от тарифной суммы заработка исполнителя к зарплатной части сметы требуется первую умножить на интегральный коэффициент $K_{\text{и}} = 1,1 \cdot 1,188 \cdot 1,3 = 1,699$.

Таблица 6 – Затраты на зарплату

Исполнитель	Оклад, руб./мес.	Среднедневная ставка, руб./раб. день	Затраты времени, раб. дни	Коэффициент	Фонд з/платы, руб.
НР	33 664	1342,09	77	1,699	175576,24
И	15 470	616,75	126	1,62	125891,01
Итого:					301467,25

4.3.2 Расчет затрат на социальный налог

Затраты на единый социальный налог включают в себя отчисления в пенсионный фонд, на социальное и медицинское страхование, составляют 30 % от полной заработной платы по проекту, т.е. $C_{\text{соц.}} = C_{\text{зп}} \cdot 0,3$. Для нашего случая $C_{\text{соц.}} = 301467,25 \cdot 0,3 = 90440,18$ руб.

4.3.3 Расчет затрат на электроэнергию

Данный вид расходов включает в себя затраты на электроэнергию, потраченную в ходе выполнения НИР на работ у используемого оборудования. Рассчитывается по формуле 12:

$$C_{\text{эл.об.}} = P_{\text{об}} \cdot t_{\text{об}} \cdot Ц_{\text{э}} \quad (12)$$

где $P_{\text{об}}$ – мощность, потребляемая оборудованием, кВт;

$Ц_{\text{э}}$ – тариф на 1 кВт·час;

$t_{\text{об}}$ – время работы оборудования, час.

Для ТПУ $Ц_{\text{э}} = 5,748$ руб./кВт·час (с НДС).

Время работы оборудования вычисляется на основе итоговых данных таблицы 3 для инженера ($T_{рД}$) при восьмичасовой продолжительности рабочего дня по формуле 13.

$$t_{об} = T_{рД} \cdot K_t, \quad (13)$$

где $K_t \leq 1$ – коэффициент использования оборудования по времени.

Рассчитаем мощность, потребляемую оборудованием по формуле 14:

$$P_{об} = P_{ном.} \cdot K_C \quad (14)$$

где $P_{ном.}$ – номинальная мощность оборудования, кВт;

$K_C \leq 1$ – коэффициент загрузки, который для технологического оборудования малой мощности равен 1.

В таблице 7 приведен расчет затрат на электроэнергию.

Таблица 7 – Затраты на электроэнергию технологическую

Наименование оборудования	Время работы оборудования $t_{об}$, час	Потребляемая мощность $P_{об}$, кВт	Затраты $\mathcal{E}_{об}$, руб.
Персональный компьютер	91,21·8·0,6	0,3	131,34
Струйный принтер	1	0,1	0,1
Итого:			131,44

4.3.4 Расчет амортизационных расходов

Рассчитаем амортизацию используемого оборудования по формуле 15:

$$C_{ам} = \frac{H_A \cdot \mathcal{C}_{об} \cdot t_{рф} \cdot n}{F_d} \quad (15)$$

где H_A – годовая норма амортизации единицы оборудования;

$\mathcal{C}_{об}$ – балансовая стоимость единицы оборудования с учетом ТЗР.

F_d – действительный годовой фонд времени работы соответствующего оборудования.

t_{pf} – фактическое время работы оборудования в ходе выполнения проекта;

n – число задействованных однотипных единиц оборудования.

Стоимость ПК 45000 руб, время использования 607 часа, тогда для него $C_{AM}(ПК) = (0,4 \cdot 45000 \cdot 607 \cdot 1) / 2408 = 4537,38$ руб. Стоимость принтера 12000 руб., его $F_d = 500$ час.; $N_A = 0,5$; $t_{pf} = 1$ час., тогда его $C_{AM}(Пр) = (0,5 \cdot 12000 \cdot 1 \cdot 1) / 500 = 12$ руб. Итого начислено амортизации 4549,38 руб.

4.3.5 Расчет расходов, учитываемых непосредственно на основе платежных документов (кроме суточных)

Время пребывания в лаборатории ТПУ корпуса №3 на летней практике составило 25 календарных дней; оплата проживания в общежитии 50 руб./день*26 дней = 1300 руб.; консалтинговые услуги – 1500 руб. Итого по данному пункту $C_{пр} = (25 - 1) \cdot 100 + 1300 + 1500 = 5200$ руб.

4.3.6 Расчет прочих расходов

Расходы на выполнение проекта, которые не учтены в предыдущих статьях принимают равными 10% от суммы всех предыдущих расходов, т.е.

$$C_{проч.} = (C_{мат} + C_{зп} + C_{соц} + C_{эл.об.} + C_{ам} + C_{нп}) \cdot 0,1$$

$$C_{проч.} = (2394 + 301467,25 + 90440,18 + 131,44 + 4549,38 + 5200) \cdot 0,1 = 40418,23 \text{ руб.}$$

4.3.7 Расчет общей себестоимости разработки

Проведя расчет по всем статьям сметы затрат на разработку, можно определить общую себестоимость проекта «Макет демонстрационной модели принципов КТ» [28]. Рассчитаем общую себестоимость проекта (таблица 8).

Таблица 8 – Смета затрат на разработку проекта

Статья затрат	Условное обозначение	Сумма, руб.
Материалы и покупные изделия	$C_{\text{мат}}$	2394
Основная заработная плата	$C_{\text{зп}}$	301467,25
Отчисления в социальные фонды	$C_{\text{соц}}$	90440,18
Расходы на электроэнергию	$C_{\text{эл.}}$	131,44
Амортизационные отчисления	$C_{\text{ам}}$	4549,38
Непосредственно учитываемые расходы	$C_{\text{нр}}$	5200
Прочие расходы	$C_{\text{проч}}$	40418,23
Итого:		444600

Таким образом, затраты на разработку составили $C = 444600$ руб.

4.3.8 Расчет прибыли

Прибыль составляет 88920 руб. (20 %) от расходов на разработку проекта.

4.3.9 Расчет НДС

НДС составляет 20% от суммы затрат на разработку и прибыли. В нашем случае это $(444600 + 88920) * 0,2 = 106704$ руб.

4.3.10 Цена разработки проекта

Цена равна сумме полной себестоимости, прибыли и НДС, в нашем случае

$$C_{\text{НИР(КР)}} = 444600 + 88920 + 106704 = 640224 \text{ руб.}$$

4.4 Оценка экономической эффективности проекта

Оценка экономической эффективности данной работы невозможна, так как она носит чисто научный характер.

4.5 Вывод

В ходе данной работы была проведена оценка сорбционной емкости пучка углеродных нанотрубок и нанотрубок, подвергнутых сжатию, с помощью моделирования методом молекулярной динамики. Бюджет затрат, приведенный в таблице 8 обусловлен необходимостью научного исследования сорбции водорода углеродными нанотрубками. Результаты исследований, при затратах 444600 рублей на реализацию, могут быть использованы для исследования свойств материалов-накопителей.

Глава 5 Социальная ответственность

В данном разделе рассматриваются вопросы, связанные с организацией рабочего места в соответствии с нормами производственной санитарии, техники производственной безопасности и охраны окружающей среды. При любых производственных условиях на рабочем месте всегда могут существовать разные опасные и вредные факторы. На человека, работа которого связана с моделированием на компьютере, воздействуют следующие вредные факторы: некомфортные метеоусловия, производственный шум, электромагнитное поле низкой частоты, недостаточная освещённость. Также могут возникнуть опасные факторы производственной среды: электрические, пожарной природы, и др. Необходимо учитывать возможность чрезвычайных ситуаций, так как лаборатория находится в Томске, наиболее типичными чрезвычайными ситуациями являются мороз и дисперсия.

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

5.1.1 Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства.

Работа проводилась по шестидневному графику. В соответствии с трудовым законодательством продолжительность рабочего времени не превышала 40 часов в неделю. На основании статьи 108 ТК РФ исполнителю проекта был представлен перерыв для отдыха и питания. Время на перерыв выбиралось исполнителями самостоятельно, однако его диапазон был регламентирован от 30 минут до 2 часов. Время перерыва в рабочее время не включается [29].

Обработка персональных данных работников проекта проводилась в соответствии с федеральным законом 185. Передача персональных данных исполнителей третьим лицам не осуществлялась.

Большую часть времени работа выполнялась сидя. Конструкция рабочего места и взаимное расположение всех элементов соответствовала антропометрическим, физиологическим и психологическим требованиям, а также характеру работы. Условия труда не допускали регулирования высоты рабочей поверхности, однако была предусмотрена подставка для ног. Таким образом, обеспечивалось оптимальное положение работника в соответствии с ТК РФ ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ [30].

Вся работа производилась на персональном компьютере. Так как ПК представляет собой совокупность приборов: процессор, экран (дисплей), клавиатура и компьютерная мышь, необходимо выполнение эргономических требований. Так на используемую клавиатуру накладывались определенные требования: расположение клавиатуры должно обеспечивать оптимальную видимость экрана. Расположение дисплея должно позволять различать изображение без необходимости изменения положения головы, дисплей на рабочем месте должен быть установлен ниже уровня глаз оператора [31]. На протяжении всей работы выполнялись требования, регламентированные ГОСТ Р 50923-96 [32].

В соответствии с Федеральным законом "О санитарно-эпидемиологическом благополучии населения" от 30 марта 1999 года N 52-ФЗ в процессе эксплуатации ПК соблюдались санитарные правила, оговорённые в [33].

Используемое рабочее помещение имеет линейные размеры 5х8м и высоту 3 м, находится на четвертом этаже здания. Помещение имеет два окна размерами 1,8х1,5м, которые имеют расположение, обеспечивающее достаточное проникновение солнечного света. С противоположной от окон стороны находится дверной проем.

Лаборатория, в которой работает исполнитель ВКР соответствует требованиям [34].

5.2 Производственная безопасность. Анализ вредных факторов производственной среды

Теоретические исследования проводились в аудитории 401 в третьем корпусе ТПУ. Выявленные опасные и вредные факторы при выполнении работ на ПК приведены в таблице 9 в соответствии с классификацией, регламентированной ГОСТ 12.0.003-2015 [35].

Таблица 9 – Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ			Нормативные документы
	Разрабо	Изготов	ление Эксплуа тация	
1.Отклонение показателей микроклимата	+	+	+	СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений [35]
2.Превышение уровня шум	+	+	+	СН2.2.4/2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки [36]
3.Отсутствие или недостаток естественного света	-	+	-	СНиП 23-05-95"Естественное и искусственное освещение [37]

Продолжение таблицы 9

4.Недостаточная освещенность рабочей зоны	+	-	-	СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному [38]
5.Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека	-	-	-	ГОСТ 12.1.038-82. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Предельно допустимые значения напряжений прикосновения и токов [39]

5.2.1. Микроклимат

На человека воздействует микроклимат, включающий в себя температуру, относительную влажность, скорость движения воздуха, атмосферное давление, тепловую радиацию нагретых предметов, солнца и вредные вещества в воздухе.

Неблагоприятное сочетание параметров микроклимата может вызвать перенапряжение механизмов терморегуляции, перегрев или переохлаждение организма. Организм человека начинает перегреваться или переохлаждаться, если параметры внешней среды отклоняются от комфортных условий.

В производственных помещениях, в которых работа с использованием ПЭВМ является основной должны обеспечиваться оптимальные параметры микроклимата для категории работ 1а по затрачиваемой работниками энергии. Санитарными нормами микроклимата производственных помещений СанПин 2.2.4.548-96 установлены оптимальные и допустимые нормы температуры, относительной влажности и скорости движения воздуха с учетом тяжести выполняемой работы и периодов года (таблицы 10,11).

Таблица 10 – Оптимальные показатели микроклимата на рабочих местах производственных помещений

Период года	Температура воздуха, °С	Температура поверхностей, °С	Относительная влажность воздуха, φ%	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	22 - 24	21 - 25	40 - 60	0,1
Теплый	23 - 25	22 - 26		0,1

Таблица 11 – Допустимые показатели микроклимата на рабочих местах производственных помещений

Период года	Температура воздуха, °С		Температура поверхностей, t°С	Отн. влажность воздуха, φ%	Скорость движения воздуха, м/с	
	Диапазон ниже оптимальных величин	Диапазон выше оптимальных величин			Если $t < t_{\text{опт}}$	Если $t > t_{\text{опт}}$
	$t_{\text{опт}}$	$t_{\text{опт}}$				

Продолжение таблицы 11

Холодный	20 - 22	24 - 25	19 - 26	15 - 75	0,1	0,1
Теплый	21 - 23	25 - 28	20 - 29	15 - 75	0,1	0,2

К мероприятиям по оздоровлению воздушной среды в производственном помещении относятся: правильная организация вентиляции и кондиционирования воздуха, отопление помещений. Вентиляция может осуществляться естественным и механическим путём. Система отопления должна обеспечивать достаточное, постоянное и равномерное нагревание воздуха. В помещениях с повышенными требованиями к чистоте воздуха должно использоваться водяное отопление. Параметры микроклимата в используемой лаборатории регулируются системой центрального отопления, и имеют следующие значения: влажность – 40%, скорость движения воздуха – 0,1м/с, температура летом – от 20 до 25°С, зимой – от 13 до 15°С. В лаборатории осуществляется естественная вентиляция. Воздух поступает и удаляется через щели, окна, двери.

5.2.2 Производственный шум

Всякий нежелательный в данный момент звук человек воспринимает как шум. Машины и механизмы, используемые на производстве, являются источниками звуков различной частоты и интенсивности, изменяющихся во времени. Нормирование шума призвано предотвратить нарушение слуха и снижение работоспособности и производительности труда человека. Продолжительное воздействие шума может привести к шумовой болезни – заболеванию организма, которое сопровождается поражением органов слуха и центральной нервной системы. Также шум вызывает головную боль, раздражительность, быструю утомляемость, потерю слуха, повышение артериального давления.

Соответственно санитарным нормам СН 2.2.4/2.1.8.562-96, предельно допустимые уровни звукового давления, уровни звука и эквивалентные уровни звука для программистов вычислительных машин в лабораториях для теоретических работ и обработки данных представлены в таблице 12.

Таблица 12 – Допустимые уровни звукового давления

Уровни звукового давления, дБ, в октавных полосах со среднегеометрическими частотами	Полоса частот, Гц	31,5	63	125	250	500	1000	2000	4000	8000
	Уровни звука, дБ	86	71	61	54	49	45	42	40	38
Уровни звука и эквивалентные уровни звука (дБА)	50									

При выполнении работы на ПЭВМ уровень шума на рабочем месте находится в норме (меньше 50 дБА), так как в помещении источником звуков является только компьютер, который не нарушает слух человека.

При значениях выше допустимого уровня необходимо предусмотреть средства коллективной (СКЗ) и индивидуальной защиты (СИЗ). К СКЗ относятся: устранение причин шума или существенное его ослабление в источнике образования; изоляция источников шума от окружающей среды средствами звуко- и виброизоляции, звуко- и вибропоглощения; применение средств, снижающих шум и вибрацию на пути их распространения. К СИЗ – применение спецодежды, спецобуви и защитных средств органов слуха: противοшумные наушники, беруши, антифоны.

5.2.3 Электромагнитные поля

Дипломная работа была выполнена с использованием ПЭВМ, которые являются источниками электромагнитного излучения. Экран, видео-кабель и системные блоки производят электромагнитное излучение. Длительное воздействие электромагнитных полей может вызвать серьезную нагрузку на зрение, нарушение в центральной нервной и сердечно-сосудистой системах. Действие электромагнитных полей может привести к головной боли, ухудшениям памяти, расстройства сна, депрессии, слабости, снижению частоты пульса. Отрицательное воздействие электромагнитного поля возрастает с повышением частоты, интенсивности излучения, продолжительности облучения и также размера облучаемой поверхности тела [41].

Согласно санитарно-эпидемиологическим правилам оценку электромагнитных полей осуществляют отдельно по напряженности электрического поля и напряженности магнитного поля. В случае магнитного поля предельно допустимый уровень определяется в зависимости от того, является излучение общим или локальным (таблица 13) [42].

Таблица 13 – Предельно допустимые уровни воздействия периодического магнитного поля частотой 50 Гц

Время пребывания (час)	Допустимые уровни магнитного поля H [А/м] / В [мкТл] при воздействии	
	общем	локальном
1	1600/2000	6400/8000
2	800/1000	300/4000
4	400/500	1600/2000
8	80/100	800/1000

Ослабление мощности электромагнитного поля достигается путем удаления источника излучения от рабочего места (экран должен находиться на расстоянии не менее 50 см от пользователя); либо путем экранирования источников излучения. Для ослабления влияния излучения от монитора персонального компьютера рекомендуется использовать защитные фильтры (экраны). В качестве индивидуальных средств защиты от электромагнитных полей промышленной частоты применяют комбинезоны, очки, спецобувь, заземляющие браслеты, заземляющие устройства, устройства для увлажнения воздуха, антиэлектростатические покрытия и пропитки, нейтрализаторы статического электричества.

5.2.4 Освещенность

Рациональное освещение помещений и рабочих мест – одно из важнейших условий создания благоприятных и безопасных условий труда. Нерационально организованное освещение может стать причиной травматизма: Плохо освещенные опасные зоны, слепящие источники света и блики от них, резкие тени и пульсации освещенности ухудшают видимость и могут вызвать неадекватное восприятие наблюдаемого объекта. Оптимальные параметры освещения способствуют повышению работоспособности и оказывают положительное влияние на психологическое состояние человека.

В зависимости от источника света освещение может быть трех видов: естественное, искусственное и совмещенное (смешанное).

Основные требования и значения нормируемой освещённости рабочих поверхностей изложены в СНиП 23-05-95 (таблица 14).

Таблица 14 – Нормы освещённости на рабочих местах производственных помещений при искусственном освещении (по СНиП 23-05-95)

Характеристики зрительной работы	Наименьший или эквивалентный размер объекта различия, мм	Разряд зрительной работы	Подразряд зрительной работы	Контраст объекта с фоном	Характеристика фона	Искусственное освещение		
						Освещенность, лк		
						При системе комбинированного освещения		При системе общего освещения
						всего	в том числе от общего	
Высокой точности	От 0,30 до 0,50	III	а	Малый	Темный	2000	200	500
						1500	200	400
			б	Малый	Средний	1000	200	300
				Средний	Темный	750	200	200
			в	Малый	Светлый	750	200	300
				Средний	Средний			
				Большой	Темный	600	200	200
			г	Средний	Светлый	400	200	200
				Большой	Средний			

5.3 Анализ опасных факторов производственной среды

5.3.1 Электробезопасность

Электробезопасность представляет собой систему организационных и технических мероприятий и средств, обеспечивающих защиту людей от вредного и опасного воздействия электрического тока.

Воздействие электрического напряжения на человека связано с протеканием через него тока. Действие электрического тока на человека носит сложный и разнообразный характер. При замыкании электрической цепи через организм человека ток оказывает термическое, электролитическое, биологическое и механическое воздействие. Прохождение тока может вызывать у человека раздражение и повреждение различных органов. По ГОСТ 12.1.038-82 установлены предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов, протекающих через тело человека при взаимодействии их с переменным током частотой 50 Гц, соответственно 2 В и 0,3 мА [42].

Для характеристики воздействия переменного тока частотой 50 Гц на человека установлены три степени его воздействия и пороговые значения (таблица 15).

Таблица 15 – Пороговые значения токов

Значение порогового тока	ощутимого	неотпускающего	фибрилляционного
Переменный, 50 Гц	0,5 мА – 1,5 мА	10 мА – 15 мА	100 мА – 5 А

Электроустановки классифицируют по напряжению: с номинальным напряжением до 1000 В (помещение без повышенной опасности), до 1000 В с присутствием агрессивной среды (помещение с повышенной опасностью) и свыше 1000 В (особо опасное помещение). Лаборатория относится к

помещениям без повышенной опасности поражения электрическим током, в которых отсутствуют условия, создающие повышенную или особую опасность.

Для предотвращения поражения электрическим током следует проводить следующие мероприятия:

- содержать оборудование в работоспособном состоянии и эксплуатировать его в соответствии с нормативно-техническими документами;
- своевременно проводить техническое обслуживание;
- соблюдать технику безопасности при работе с оборудованием;
- проводить инструктаж для работников.

В помещении применяются следующие меры защиты от поражения электрическим током: недоступность токоведущих частей для случайного прикосновения, все токоведущие части изолированы и ограждены. Недоступность токоведущих частей достигается путем их надежной изоляции, применения защитных ограждений, расположения токоведущих частей на недоступной высоте. К СКЗ относятся заземление и разделение электрической сети с помощью трансформаторов – в результате изолированные участки сети обладают большим сопротивлением изоляции и малой емкостью проводов относительно земли, за счет чего значительно улучшаются условия безопасности. В качестве ИСЗ от поражения электрическим током применяют диэлектрические перчатки, боты и галоши, ковры, изолирующие подставки и переносные заземления.

5.3.2 Факторы пожарной и взрывной природы

Согласно НПБ 105-03 по взрывопожарной и пожарной опасности помещения подразделяются на категории А, Б, В, Г и Д [44]. В данном случае, работа проводилась в компьютерном классе, в котором горючие вещества и материалы находятся в твердом состоянии, поэтому помещение относится к категории В. Возникновение пожара при работе с электронной аппаратурой

может быть по причинам электрического характера, в том числе: короткое замыкание, перегрузки по току, статическое электричество и т. д.

Для устранения причин возникновения и локализации пожаров в помещении лаборатории должны проводиться следующие мероприятия:

- использование только исправного оборудования;
- проведение периодических инструктажей по пожарной безопасности;
- отключение электрооборудования, освещения и электропитания при предполагаемом отсутствии обслуживающего персонала или по окончании работ;
- содержание путей и проходов для эвакуации людей в свободном состоянии.

Для локализации или ликвидации загорания на начальной стадии используются первичные средства пожаротушения. Первичные средства пожаротушения обычно применяют до прибытия пожарной команды.

Первичные средства пожаротушения включают в себя пожарные рукава, пожарный кран, переносные и передвижные огнетушители. В зависимости от применяемого огнетушащего вещества огнетушители разделяются: водные, пенные, газовые, порошковые и комбинированные:

- Огнетушитель воздушно-пенный передвижной ОВП предназначен для тушения загораний и начинающихся пожаров, различных веществ и материалов, за исключением щелочных металлов, веществ, горение которых происходит без доступа воздуха, электроустановок, находящихся под напряжением.

- Углекислотные огнетушители применяются для тушения возгораний различных веществ и материалов и заряжены сжиженным углекислотным газом. Углекислота не проводит ток, поэтому углекислотные огнетушители можно применять для тушения пожаров в электроустановках, находящихся под напряжением не более 10000В, с расстояния не менее одного метра.

- Порошковые огнетушители предназначены для тушения горящих твердых веществ и электроустановок под напряжением до 1000 В. Кроме того, порошковые применяют для тушения документов.

Огнетушители следует располагать на видных местах вблизи от выходов из помещений. Размещение первичных средств пожаротушения в коридорах, переходах не должно препятствовать безопасной эвакуации людей. Здание должно соответствовать требованиям пожарной безопасности, а именно, наличие охранно-пожарной сигнализации, плана эвакуации, порошковых или углекислотных огнетушителей с поверенным клеймом, табличек с указанием направления к выходу.

При возникновении возгорания необходимо немедленно прекратить работу, выйти из программы и отключить питание компьютера позвонить в подразделение пожарной охраны по телефону 01 или 010, сообщить случившемся руководителю подразделения и приступить к тушению огня первичными средствами пожаротушения.

На рисунке 16 представлен план эвакуации из лабораторий, находящихся в аудитории 401 четвертого этажа третьего корпуса ТПУ.

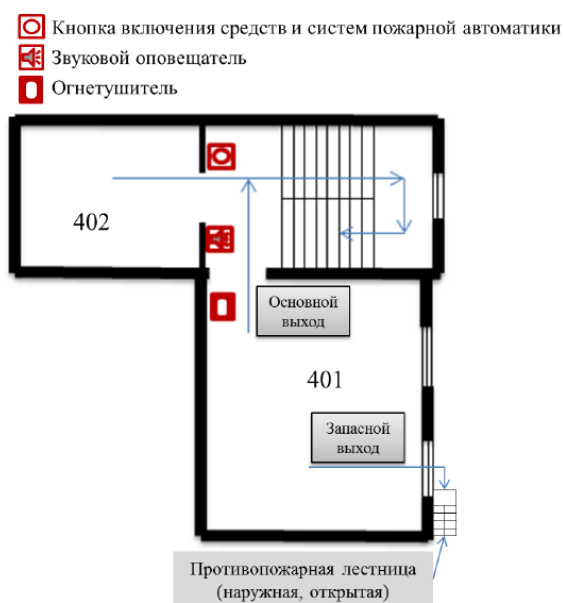


Рисунок 16 – План эвакуации из лабораторий.

5.4 Охрана окружающей среды

Охрана природы и рациональное использование природных ресурсов – одна из важнейших экономических и социальных задач, так как ресурс нашей планеты не безграничен. Поэтому рациональное использование бумаги способно не только защитить миллионы деревьев, но и избавить нас в будущем от гуманитарной катастрофы. 115 млрд. страниц офисной бумаги ежегодно во всём мире превращается в макулатуру из-за копировальных аппаратов и принтеров. Технология производства бумаги – процесс, загрязняющий экологию не только региона, где расположен ЦБК, но и всей планете. Газы, выделяющиеся при производстве, имеют парниковый эффект и пагубно сказываются на окружающей среде.

При выполнении выпускной квалификационной работы с использованием компьютера, возможно возникать отходы бумаги. Бумаги используются для записи результатов моделирования. Для охраны окружающей среды от загрязнения и истощения, можно использовать бумагу повторно и перерабатывать отходы методом повторного изготовления.

5.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Производство находится в городе Томске типичными чрезвычайными ситуациями на объекте, в данном случае, могут быть сильные морозы, которые характерны для Сибири и диверсии. Достижение критически низких температур может привести к авариям систем теплоснабжения и жизнеобеспечения, приостановке работы или обморожениям. В случае переморозки труб должны быть предусмотрены запасные обогреватели, обеспечена устойчивость теплоснабжения за счет запасных автономных источников теплоснабжения, кольцевания системы, заглубления теплотрасс. Их количества и мощности должно хватать для того, чтобы работа на производстве не прекратилась.

Чрезвычайные ситуации, возникающие в результате диверсий, возникают все чаще. Зачастую такие угрозы оказываются ложными, но случаются взрывы в действительности. Для предупреждения вероятности осуществления диверсии предприятие необходимо оборудовать системой видеонаблюдения, круглосуточной охраной, пропускной системой, надежной системой связи, а также исключения распространения информации о системе охраны объекта, расположении помещений и оборудования в помещениях, системах охраны, сигнализаторах, их местах установки и количестве. Должностные лица раз в полгода проводят тренировки по отработке действий на случай экстренной эвакуации.

5.6 Вывод

В данном разделе рассмотрены безопасность и гигиена труда при осуществлении моделирования изменения структуры пучка нанотрубок в среде водорода. Были выявлены вредные и опасные факторы рабочей зоны, причины и средства защиты, рассмотрены чрезвычайные ситуации и поведение в них. Социальная ответственность обеспечивает взаимосвязь между лицом (работодателем) и обществом (работником), характеризуется взаимными правами и обязанностями по выполнению социальных норм и наложением воздействия в случае ее нарушения. Рассмотрена типичная ЧС и меры по предупреждению чрезвычайных ситуаций.

Заключение

В настоящей работе проведено моделирование пучка углеродных нанотрубок в среде водорода, а также под воздействием механического давления. Моделирование проводилось методом молекулярной динамики в программе LAMMPS. Конструирование пучка проводилось в программах VMD и Atomsk. Анализ и визуализация структуры сделаны с помощью программы Ovito.

Для расчета были рассмотрены системы из жгута, составленного семью нанотрубками (10,10) длиной 29 нм каждая, а также молекулярным водородом. Вся система жгут-водород, помещалась в периодические граничные условия в ячейке моделирования размерами 31 нм × 31 нм × 31 нм. Создание необходимого давления в системе регулировалось заданием необходимой концентрации водорода. Все расчеты проходили при комнатной температуре. Первая серия расчетов включала расчеты в ячейке без механической деформации нанотрубок, вторая серия расчетов предусматривала механическое сжатие нанотрубок в направлении перпендикулярном оси жгута.

Для моделирования пучка нанотрубок в среде водорода использовался потенциал Airebo.

Для моделирования механического сжатия была применена симуляция воздействия жесткого поршня с помощью команды wall/piston.

По результатам работы можно сделать следующие выводы:

1. Разработан алгоритм для моделирования пучка УНТ в водородной атмосфере при давлениях 1, 4, 50, 100, 200 бар и алгоритм для моделирования прессования пучка нанотрубок при приложенном механическом давлении в среде водорода при тех же давлениях;

2. Деформация пучка УНТ приводит к понижению его сорбционных способностей;

3. Максимальная сорбция составила 1,6 вес. % недеформированными УНТ при давлении 200 бар и T=300 К.

Список литературы

1. Physical properties of carbon nanotubes. / Saito R., Dresselhaus G., Dresselhaus M. S. – London: Imperial College Press, 1998, 380 p.
2. Dresselhaus, S. Graphite fibers and filaments. / S. Dresselhaus : Springer-Verlag, 1988. – 339 p.
3. Елецкий А. В. Углеродные нанотрубки //Успехи физических наук. – 1997. – Т. 167. – №. 9. – С. 945-972.
4. Степанов А. В. Каналирование атомных частиц низких энергий в углеродных нанотрубках вв.: дис. ... канд. физ.- мат. наук: 01.04.07: защищена 25.07.2017: утв. 22.12.2017 – Чебоксары, 2017. – 118 с.
5. Сухно И.В., Бузько В.Ю. Углеродные нанотрубки . - Краснодар: КубГУ, 2008.
6. Guo W. F. et al. Positron annihilation in carbon nanotubes //Materials science forum. – Trans Tech Publications, 2009. – Т. 607. – С. 198-200.
7. Tuyen L. A. et al. Positron annihilation characteristics in multi-wall carbon nanotubes with different average diameters //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2013. – Т. 443. – №. 1. – С. 012065.
8. Elliott J. A. et al. Collapse of single-wall carbon nanotubes is diameter dependent //Physical review letters. – 2004. – Т. 92. – №. 9. – С. 095501.
9. Chan S. P. et al. Carbon nanotube bundles under high pressure: transformation to low-symmetry structures //Physical Review B. – 2003. – Т. 68. – №. 7. – С. 075404.
10. Sun D. Y. et al. Pressure-induced hard-to-soft transition of a single carbon nanotube //Physical Review B. – 2004. – Т. 70. – №. 16. – С. 165417.
11. Елецкий А. В. Механические свойства углеродных наноструктур и материалов на их основе //Успехи физических наук. – 2007. – Т. 177. – №. 3. – С. 233-274.
12. A. C. Dillon et al., Hydrogen storage in carbon single-wall nanotubes // Nature /–1997. –386.–P.377;

13. Y. Ye et al, Hydrogen adsorption and cohesive energy of single-walled carbon nanotubes // *Applied Physics Letters* / –Vol. 74. –№ 16. – 1999. –P. 2307;
14. Chambers, A., C. Park, R. T. K. Baker and N. M. Rodriguez, Hydrogen Storage in Graphite Nanofibers // *Journal of Physical Chemistry B* /– 1998. – P.4253;
15. P. Chen, X. Wu, J. Lin, K. L. Tan, High H₂ Uptake by Alkali-Doped Carbon Nanotubes Under Ambient Pressure and Moderate Temperatures// *Science* /– 1999.–285. – P.91;
16. C. Liu, Y. Y. Fan, M. Liu, Hydrogen Storage in Single-Walled Carbon Nanotubes at Room Temperature // *Science* /–Vol.286. –№5. –1999. –P.1127;
17. Stan G., Bojan M.J., Curtarolo S., Gatica S.M., Cole M.W. *Phys. Rev. B*, 2000, Vol. 62, P. 2173.
18. Федоров А. С., Сорокин П. Б. Плотность и термодинамика водорода, адсорбированного на поверхности однослойных углеродных нанотрубок // *Физика твердого тела*. – 2006. – Т. 48. – №. 2. – С. 377-382.
19. Назаров А.А., Мулюков Р.Р. Атомистическое моделирование материалов, наноструктур и процессов нанотехнологии. Учебное пособие для студентов-физиков. Уфа, РИО БашГУ, 2010.- 156 с.
20. Stuart, S. J. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions / S. J. Stuart, A. B. Tutein, J. A. Harrison // *The Journal of Chemical Physics*. – 2000. – V. 112, № 14. – P. 6472-6486.
21. Plimpton, S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics / S. Plimpton // *Journal of Computational Physics*. – 1995. – V. 117, № 1. – P. 1-19.
22. Humphrey, W.VMD - Visual Molecular Dynamics / W. Humphrey, A. Dalke, K. Schulten // *Journal of Molecular Graphics*. – 1996. – V. 14. – P. 33-38.
23. Цирельсон В. Г. Квантовая химия // *Молекулы, молекулярные системы и твердые тела*. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. – 2010. – Т. 496. – С. 8.

24. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool //Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2009. – Т. 18. – №. 1. – С. 015012.
25. Hirel P. AtomsK: A tool for manipulating and converting atomic data files //Computer Physics Communications. – 2015. – Т. 197. – С. 212-219.
26. Кнышова Е. Н. Экономика организации: учебник / Е. Н. Кнышова, Е. Е. Панфилова. – Москва: Форум Инфра-М, 2012. – 334 с.: ил. – Профессиональное образование.
27. Бочаров В. В. Инвестиции : учебник для вузов / В. В. Бочаров. – 2-е изд. – СПб: Питер, 2009. – 381 с. – Учебник для вузов.
28. Несветаев Ю. А. Экономическая оценка инвестиций: учебное пособие / Ю. А. Несветаев; Московский Государственный индустриальный университет; Институт дистанционного образования. – 3-е изд., стер. – Москва: Изд-во МГИУ, 2006. – 162 с.
29. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 01.04.2019).
30. ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.
31. ГОСТ Р 50948-2001 Средства отображения информации индивидуального пользования. Общие эргономические требования и требования безопасности
32. ГОСТ Р 50923-96. Дисплей. Рабочее место оператора. Общие эргономические требования и требования к производственной среде. Методы измерения.
33. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы.
34. ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.
35. ГОСТ 12.0.003-2015 «Опасные и вредные производственные факторы. Классификация».

36. СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.
37. СН 2.2.4/2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки.
38. СНиП 23-05-95"Естественное и искусственное освещение.
39. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному.
40. ГОСТ 12.1.038-82. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Предельно допустимые значения напряжений прикосновения и токов.
41. ГОСТ 54 30013-83 Электромагнитные излучения СВЧ. Предельно допустимые уровни облучения. Требования безопасности
42. СанПиН 2.2.4.1191-03. Электромагнитные поля в производственных условиях.
43. ГОСТ 12.1.038-82. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Предельно допустимые значения напряжений прикосновения и токов
44. НПБ 105-03. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности